

рис. 1. – Рамановские спектры, на разных участках образца.

Таким образом, проведенный анализ позволил установить, что в образцах, полученных в условиях электрического взрыва смеси графита с катализаторами, присутствует аморфный углерод, графит и углерод в алмазоподобной форме.

Исследования выполнены при финансовой поддержке гранта РФФИ № 16-02-00857-а.

Список публикаций:

[1] Долматов В. Ю // Ультрадисперсные алмазы детонационного синтеза. – СПб.: СПбГПУ, 2003. – 344 с.

[2] N. V. Melnikova, D. O. Alikin, Yu. B. Melnikov, I. G. Grigorov, S. A. Chaikovsky, N. A. Labetskaya, I. M. Datsko, V. I. Oreshkin, N. A. Ratakhin, K. V. Khishchenko // Study of composition of the ultrafine material produced from graphite-catalyst mixture under extreme energy action. *Journal of Physics: Conference Series*. 774 (1) 012012 P.1-7 (2016).

## Анализ влияния теплоты фазовых переходов на скорость миграции включений в кристалле

**Карпенко Анастасия Сергеевна**  
Южный федеральный университет  
Гармашов Сергей Иванович, к.ф.-м.н.  
[as.karpenko911@yandex.ru](mailto:as.karpenko911@yandex.ru)

Явление миграции жидкого включения в неоднородно нагретом кристалле (или термомиграция) получило применение в полупроводниковой технологии как метод создания глубоких p-n переходов [1]. Это явление сопровождается рядом процессов (прежде всего, кристаллизацией, растворением и диффузией), и для их исследования также можно использовать данное явление [1,2]. И в первом, и во втором случае важно иметь адекватную математическую модель, которая позволила бы правильно рассчитать скорость миграции включения при заданных условиях. Одновременное учитывать все факторы, влияющие на скорость миграции, довольно затруднительно с математической точки зрения, поэтому обычно в моделях используются некоторые упрощения.

Одним из факторов, оказывающим влияние на скорость миграции жидкого включения в кристалле, является теплота фазовых переходов (ФП), выделяющаяся (поглощающаяся) при протекании процессов кристаллизации (растворения). Эта теплота будет изменять распределение температур в области включения, вследствие чего будет меняться и скорость кристаллизации (растворения). Аналитические оценки степени влияния теплоты ФП на скорость термомиграции в установившемся режиме этого процесса приведены в обзоре [1]. В общем случае, например, когда тепловые условия термомиграции не являются стационарными [2], а межфазная кинетика описывается нелинейными функциями, строгий подход к задаче требует совместного решения уравнений тепло- и массопереноса.

Целью настоящей работы является анализ влияния теплоты ФП на массоперенос в жидком включении в стационарных и нестационарных тепловых условиях с учётом нелинейной межфазной кинетики на основе разработанной численной модели процесса термомиграции. При построении модели и соответствующей компьютерной программы [3] (рис. 1а) предполагалось, что жидкое включение представляет собой плоскую прослойку, заключённую между двумя кристаллическими пластинами, а вся композиция находится в вакууме и подвергается одностороннему нагреву для создания в прослойке градиента температуры.

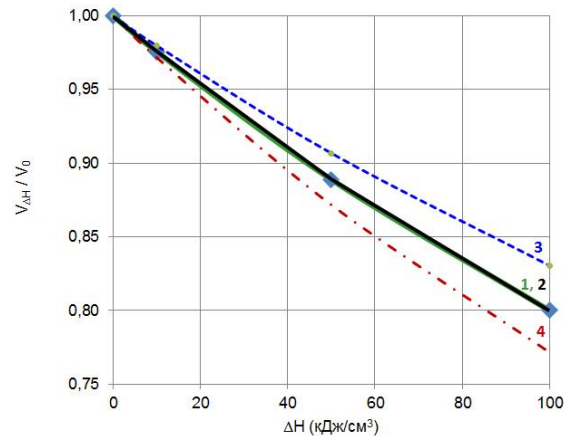
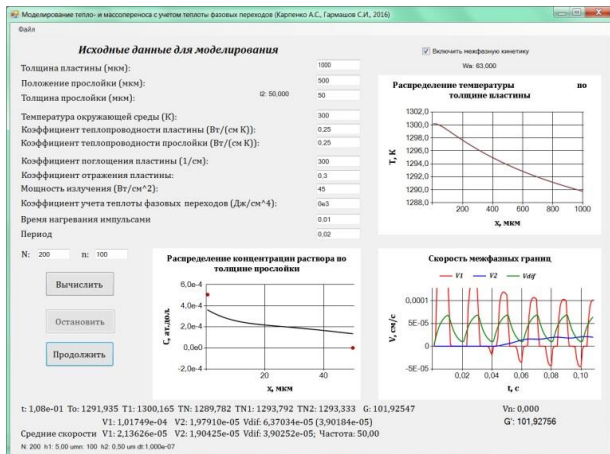


рис.1 Интерфейс разработанной программы (а) и зависимость относительного изменения рассчитанной скорости термомиграции от скрытой теплоты кристаллизации в расчёте на единицу объёма  $\Delta H$  (б) (без учёта межфазной кинетики в стационарном тепловом режиме: расчёт по [1] – кривая 1; наст. работа – кривая 2; с учётом межфазной кинетики в стационарном (кривая 3) и нестационарном (кривая 4) тепловых режимах)

Для нахождения распределения температуры в композиции решалось одномерное нестационарное уравнение теплопроводности с граничными условиями, учитывающими теплообмен с окружающей средой по закону Стефана-Больцмана. По температурам на границах прослойки рассчитывались значения равновесных концентраций, входящих в граничные условия для одномерного нестационарного уравнения диффузии, в результате решения которого вычислялись скорости движения межфазных границ, а по ним – теплота ФП, учитываемая при дальнейшем решении уравнения теплопроводности. Совместное решение уравнений тепло- и массопереноса осуществлялось по явной схеме метода сеток. При проведении расчётов вначале вычислялась скорость термомиграции без учёта теплоты ФП ( $V_0$ ), с которой затем сравнивались результаты расчёта скорости термомиграции, выполненного с учётом этой теплоты ( $V_{\Delta H}$ ).

На рис. 1б представлены зависимости относительного изменения скорости термомиграции ( $V_{\Delta H} / V_0$ ) от скрытой теплоты кристаллизации  $\Delta H$  (на единицу объёма), рассчитанные по формулам из обзора [1] (кривая 1) и по настоящей численной модели (кривая 2) для случая стационарных тепловых условий процесса термомиграции и отсутствия влияния межфазной кинетики на массоперенос в прослойке.

Из сравнения этих зависимостей следует, что учёт влияния теплоты ФП на массоперенос приводит, как и отмечалось в [1], к снижению скорости термомиграции. При этом поправки на учёт теплоты ФП, сделанные по формулам из [1] для скорости термомиграции, хорошо согласуются с результатами проведённых численных расчётов.

Интересно, что если учитывать межфазную кинетику, то в нестационарных тепловых условиях, вызванных колебаниями мощности излучения нагревателя, эффект снижения скорости термомиграции из-за влияния теплоты ФП (ср. кривую 4 с кривыми 1-3 на рис. 1б) усиливается.

В докладе обсуждаются результаты проведённых расчётов скорости термомиграции в разных нестационарных тепловых условиях с учётом межфазной кинетики и приводится интерпретация полученных зависимостей.

#### Список публикаций:

- [1] Лозовский В.Н., Лунин Л.С., Попов В.П. Зонная перекристаллизация градиентом температуры полупроводниковых материалов. Москва: Металлургия. 1987.
- [2] Гершанов В.Ю., Гармашов С.И. Нелинейные нестационарные эффекты в процессах массопереноса. Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета. 2014.
- [3] Гармашов С.И., Карпенко А.С. // Современные информационные технологии: тенденции и перспективы развития: материалы XXIII науч. конф. Ростов-на-Дону: Изд-во Южного федерального университета. 2016. С.97.